

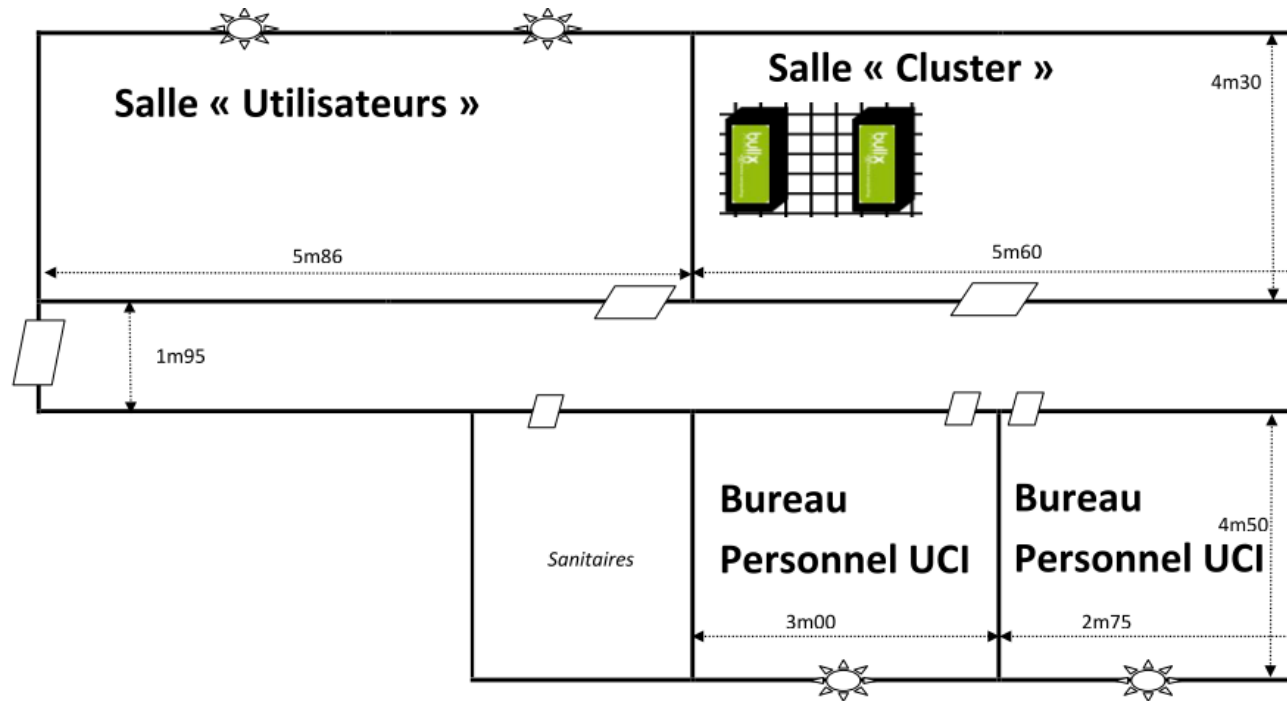
# Bilan de l'Unité de Calcul Intensif Université Oran 1 Ahmed Ben Bella

Présenté par :  
Mr Cherifi Youcef

# Introduction

- ▶ L'Unité de Calcul Intensif de l'Université d'Oran 1 (UCIOran1) met à la disposition du personnel chercheur, des moyens matériels et logiciels de calcul intensif nécessitant des ressources importantes en temps, en mémoire, ou en espace disque.
- ▶ Son montage a démarré en 2010 avec la mise en forme d'un cahier des charges faisant ressortir les besoins des chimistes, physiciens et informaticiens en calcul intensif. Les appels d'offre ont convergé vers la réception du cluster BullX durant la semaine du 11-15 novembre 2011 (formation, benchmarking, et réception provisoire). Après la mise au point des outils de sécurisation du cluster (powerchute automatique, et adresse IP public sécurisée), le cluster est mis en fonctionnement permanent depuis le 21 mars 2012. Depuis l'expiration de la période de garantie la fin 2015, le cluster a fonctionné correctement jusqu'au 12 février 2017, nous avons constaté une défaillance au niveau des batteries de l'onduleur, qui nous a forcée à arrêter définitivement le cluster juin 2017 et on a entamé la procédure pour acquérir les deux batteries.

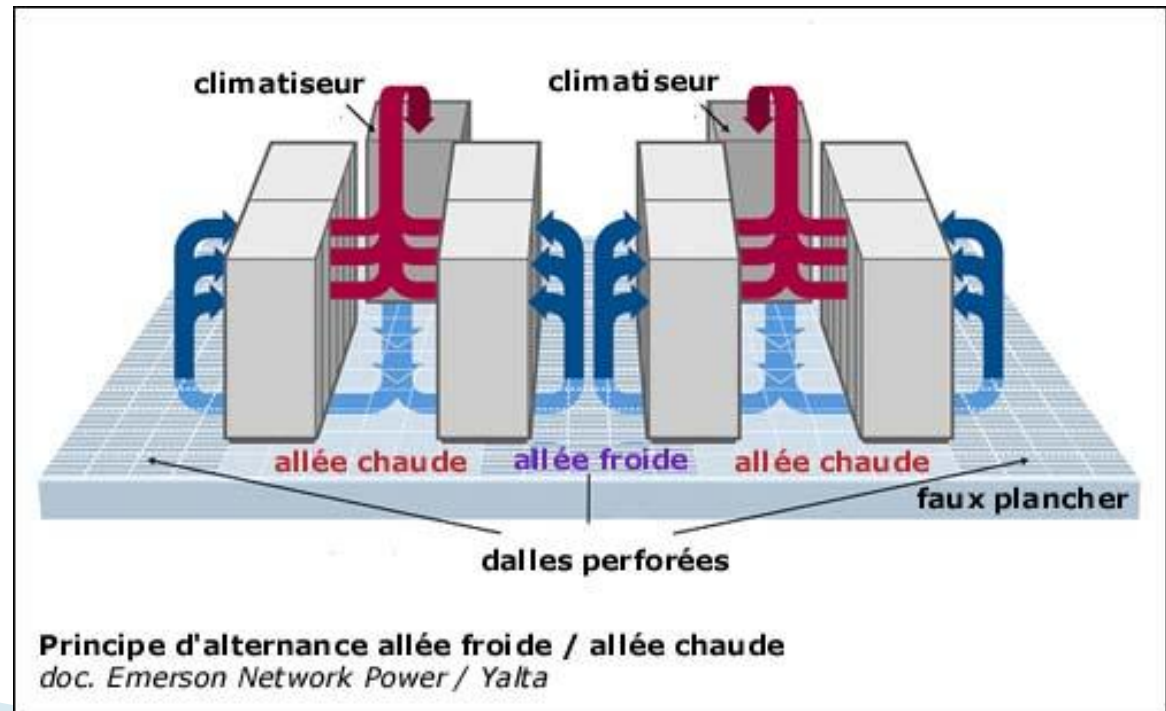
# Architecture UCI Oran 1



- ▶ Comme illustré dans le schéma ci-dessous, l'UCI UOran1 est composée de : salle "cluster" abriant (cluster BullX, Clim, Onduleur APC), salle "utilisateurs" pour la formation et l'accueil des utilisateurs, deux bureaux pour le personnel de l'UCI.
- ▶ Le personnel permanent de l'UCI est composé de :  
deux ingénieurs : Mr Youcef CHERIFI, Mme Manal BOUABIDA.

# Etat d'aménagement UCI Oran 1

2 Armoires	Emerson S20 puissance 20 KW Débit d'air 50.000 BTU/hr	Fonctionnel
Stabilisateur	Kebo 60 KVA	Fonctionnel
Aménagement (faux plancher, réseau électrique)	Faux plancher technique surface 24,80 m <sup>2</sup> Dalles pleines et perforées 600*600mm Armoire électrique Disjoncteur HAGER calibre 4*100 A	Fonctionnel



# Systeme du Cluster UCI Oran 1

## *Systeme :*

BullX sous Redhat

## *Outils de gestion du cluster :*

Slurm, DBM tool commandes pour la gestion de la clusterdb, IBMS tool gestion infiniband hardware, Nodectrl pour contrôler le démarrage et l'arrêt des nœuds, Nagios monitoring service, Intelligent Platform Management Interface (IPMI), Console management (ConMan) pour gérer un ensemble de consoles simultanément, Cluster Shell (clush) programme d'exécution de commandes parallèle dans un cluster.

## *Compilateurs :*

Compilateurs Intel C et Fortran, GCC (C++, Fortran, ...), Java OpenJDK, ...

## *Librairies de base :*

BullxMPI basé sur Open MPI, MKL (Math Kernel Libraries), LAPACK, BLACS, ScaLAPACK, FFT,

# Etat du Cluster UCI Oran 1

Matériels	Configuration	Etat Fonctionnel
32 nœuds calcul	(Bullx R424-E2) de 2U : 2 x X5670, 2.93 GHz, 24 Go, 500 Go Architecture Westmere (32 nm) / ...Sandy bridge de peu (80 %, 8 op./cyc.)	Fonctionnel
1 nœuds d'admin.	(Bullx R423 - E2) : 2 x X5670, 2.93 GHz, 48 Go, 2 TB	Fonctionnel
1 nœud de visu/pré/post	(Bullx R425-E2) : 2 x X5670, 2.93 GHz, 48 Go, 2 TB	Fonctionnel
1 serv. stockage	NFS (Bullx R423 - E2) : 2 x X5670, 2.93 GHz, 48 Go, 500 Go	Fonctionnel
Baie de stockage	(Optima 2000) 20 TO	Fonctionnel
Réseau Infiniband	QDR Infiniband QFSP de 36 ports à 40 Gb/s	Fonctionnel
Réseau de gestion	1 switch Gigabit Ethernet de 48 ports	Fonctionnel
Armoires	2 armoires Bull 42 U, 19"	Fonctionnel
1 onduleur	APC 20 KVA (16 000 Watt), autonomie 23 min à 75% de charge	En Panne

## ***Puissance de calcul :***

32 nœuds (12 cores par nœud) = 384 cores physiques  
 Puiss. max = 4.5 Tflops  
 HPCC/HPL  $\approx$  3.57 Tflops

Armoire 1
Nœud de visualisation - 0.8 kw R425E2
Nœud d'administration - 0.6 kw MNGT-0
Serveur de stockage - 0.6 kw NFS/MNGT-1
Baie de stockage - 0.640 kw Optima2000
Console - 0.05 kw
Switch Infiniband - 0.202 kw ISR 4036
Switch Ethernet - 0.1 kw FLS648
Nœud 1 - 1400 kw R424E2
Nœud 2 - 1400 kw R424E2
...
Nœud 32 - 1400 kw R424E2

Armoire 2
Onduleur Online APC Smart UPS 20 KVA/16 kw



# Etat du Cluster expérimental Alfatron

- ▶ L'accès se fait par le biais d'une connexion suivant le protocole « ssh » à travers une adresse publique **193.194.74.13** ou bien par le domaine « **uci.univ-oran1.dz** » en spécifiant le nombre du port.
- ▶ Nous mettons à disposition notre site internet à l'adresse <https://uci.univ-oran1.dz> afin de garantir le lien entre l'UCI Oran 1 et ces chers utilisateurs



Cluster 8 nœuds de calcul ALFATRAN	Intel i7, 8 cores, 3.4 GHz, Ram 16 Go, HDD 1 To	03 / Fonctionnel 05 en panne
2 nœuds	2xIntel E5 2665, 32 cores, 2.4 GHz, Ram 48 Go, HDD 2 To	Fonctionnel
Une station de travail sous Linux avec une adresse publique	Intel(R) Core2 Duo CPU E7200 2.53GHz, Ram 2 Go	Fonctionnel

# Domaines de Calcul

L'UCI accueille des utilisateurs des laboratoires et des départements de l'université d'Oran 1, à savoir :

- ▶ Laboratoire de chimie physique et macromoléculaire
- ▶ Laboratoire de physique des couches minces et matériaux électroniques
- ▶ Laboratoire de physique théorique
- ▶ Laboratoire d'informatique et des technologies de l'information
- ▶ Enseignants/chercheurs du département de Chimie, de Physique et d'Informatique

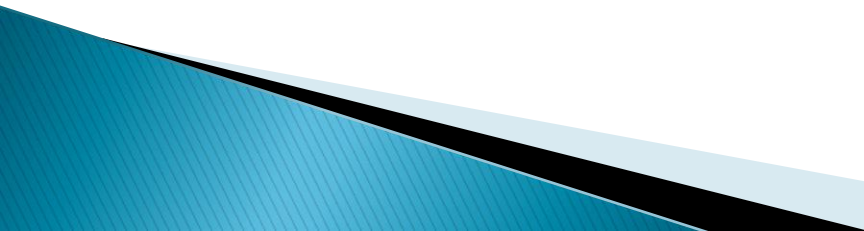
Plusieurs domaines de calculs sont abordés par nos utilisateurs, à savoir :

- ▶ Chimie quantique et dynamique moléculaire
- ▶ Physique des particules
- ▶ Programmation mathématique et optimisation
- ▶ Fouille de données

Logiciels exploités : CPMD, ROOT, CPLEX, GECODE.

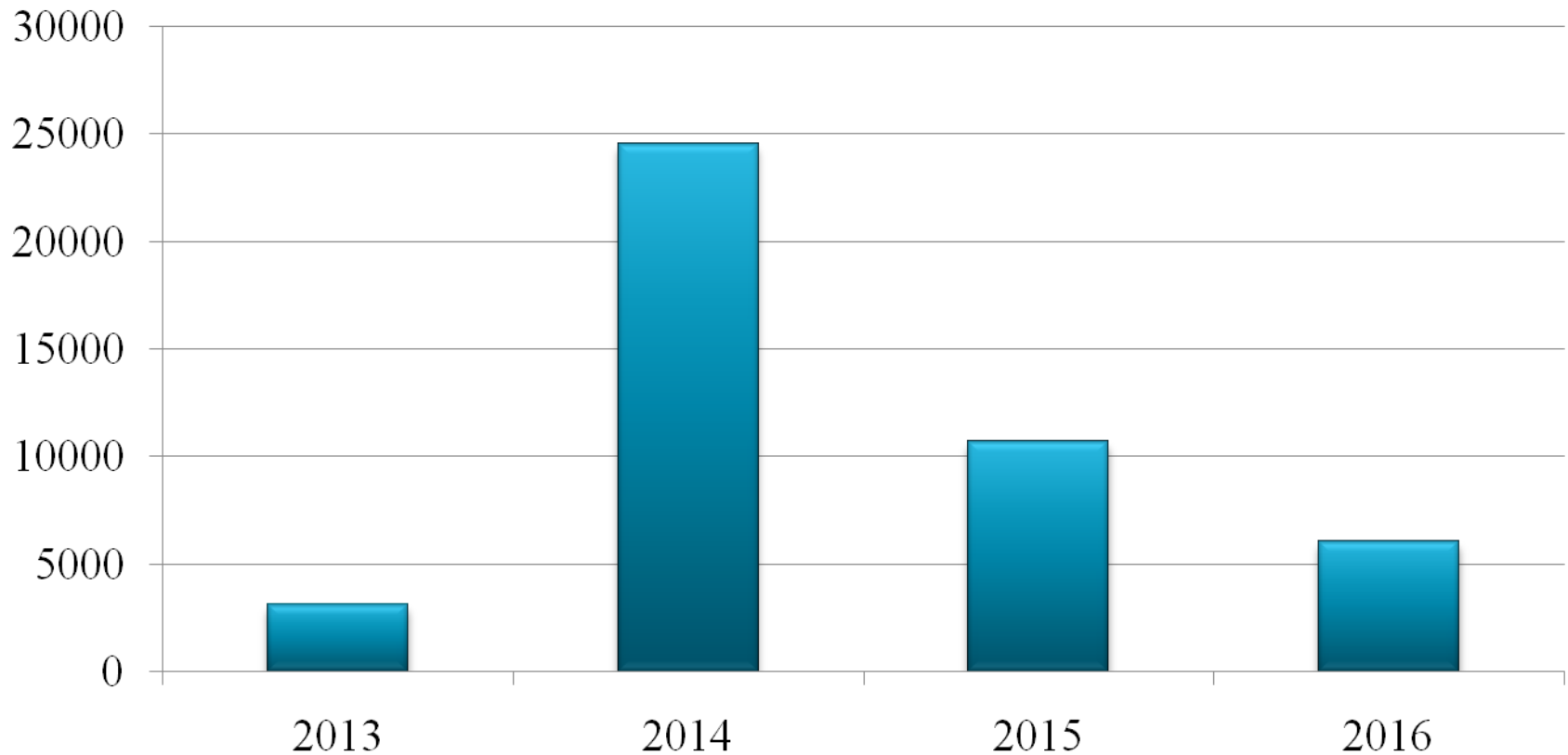


# Taches des ingénieurs UCI Oran 1

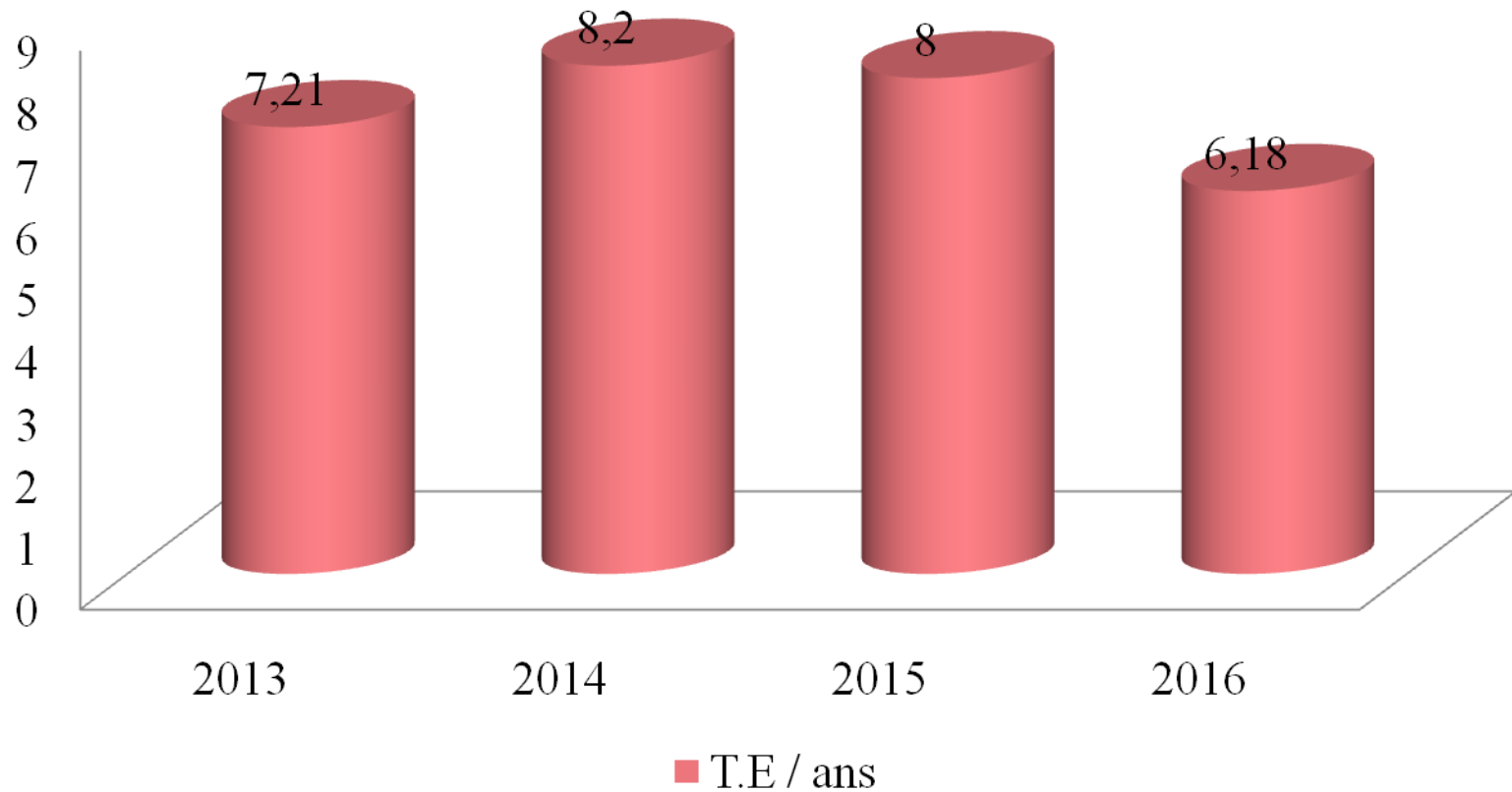
- ▶ Administration du Cluster BullX.
  - ▶ Maintenance du Cluster BullX.
  - ▶ Benchmark du Cluster BullX.
  - ▶ Détection de Défaillance au niveau du Cluster.
  - ▶ Evaluation de performance du Cluster BullX.
  - ▶ Installation à la demande de logiciels, librairie, etc....
  - ▶ Accompagnement des utilisateurs par mail/site.
  - ▶ Conseils et aide fournies aux utilisateurs.
  - ▶ Formation des utilisateurs au HPC.
  - ▶ Montage d'un Cluster Expérimental avec 08 PCs.
- 

# Nombre de job (Complété)/Année

**Nbr job / ans**

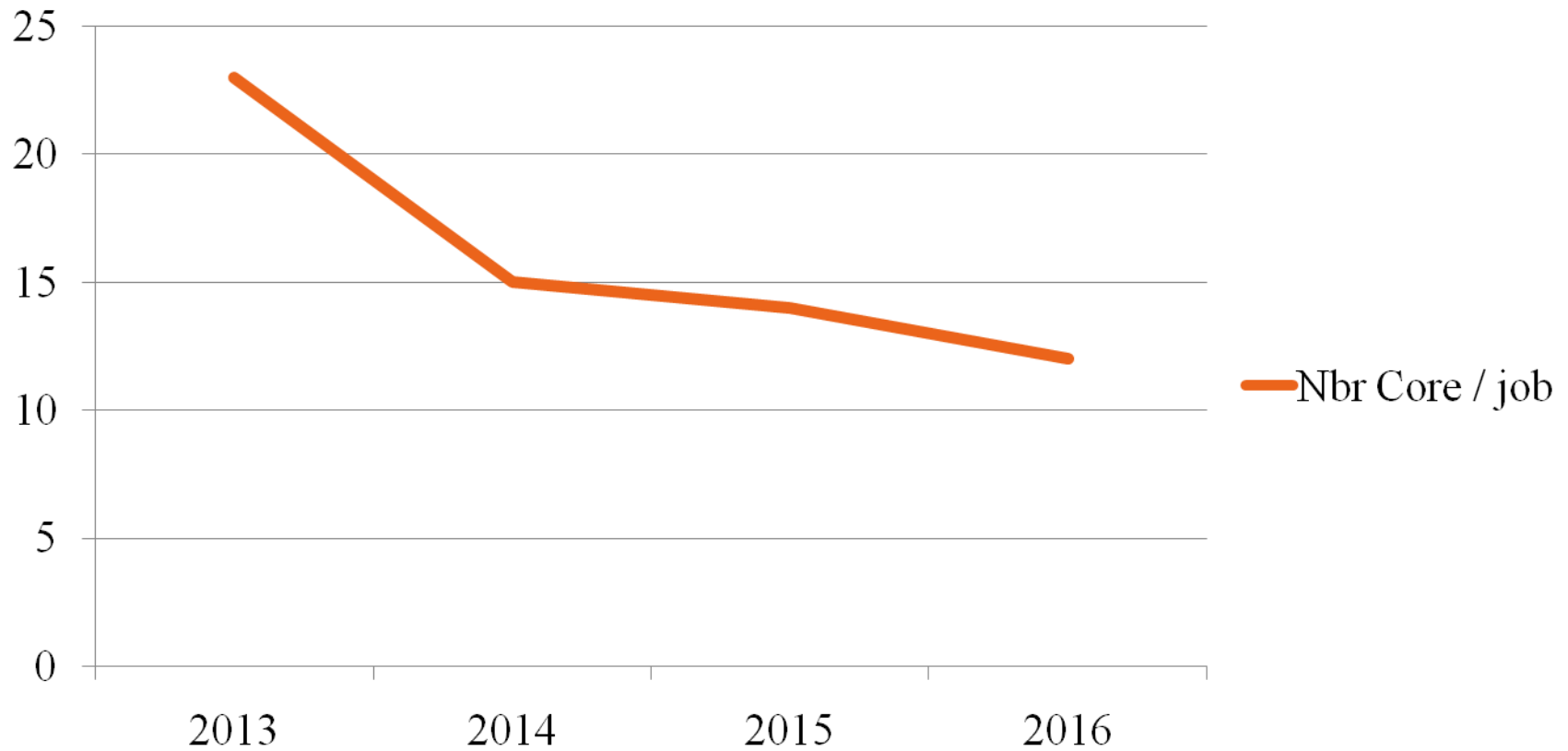


# Temps d'exécution/ job (jj.hh)



# Nombre de cœurs / job

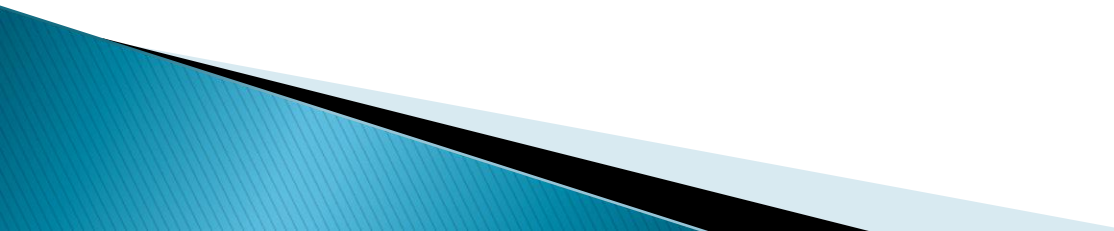
**Nbr Core / job**



# Historique des pannes UCI

Description de la Panne	Date réparation	Nœud	Réparation
LED rouge clignotant	18-12-2013	Haytham-15	Vérification.
LED rouge clignotant	29-12-2013	Haytham-15	Changement de l'alimentation.
Disque Dure Optima 2000 H.S	13-09-2015	Baie Stockage	Remplacement du disque dur
Carte mère H.S	07-10-2015	Haytham-24	Remplacement de la carte mère
Carte mère H.S	21-10-2015	Haytham-24	Remplacement de la carte mère
Carte mère H.S	28-10-2015	Haytham-24	Mise à jour du Bios
Carte mère H.S	17-02-2016 (~ retard)	Haytham-24	Remplacement de la carte mère
Câble Infini Band manquant	13-04-2016 (~ retard)	Haytham-23	Remplacement d'un câble Infiniband
Batterie Secondaire de l'Onduleur	12-02-2017	APC	En cours
Batterie Principale de l'Onduleur	Juin 2017	APC	En cours

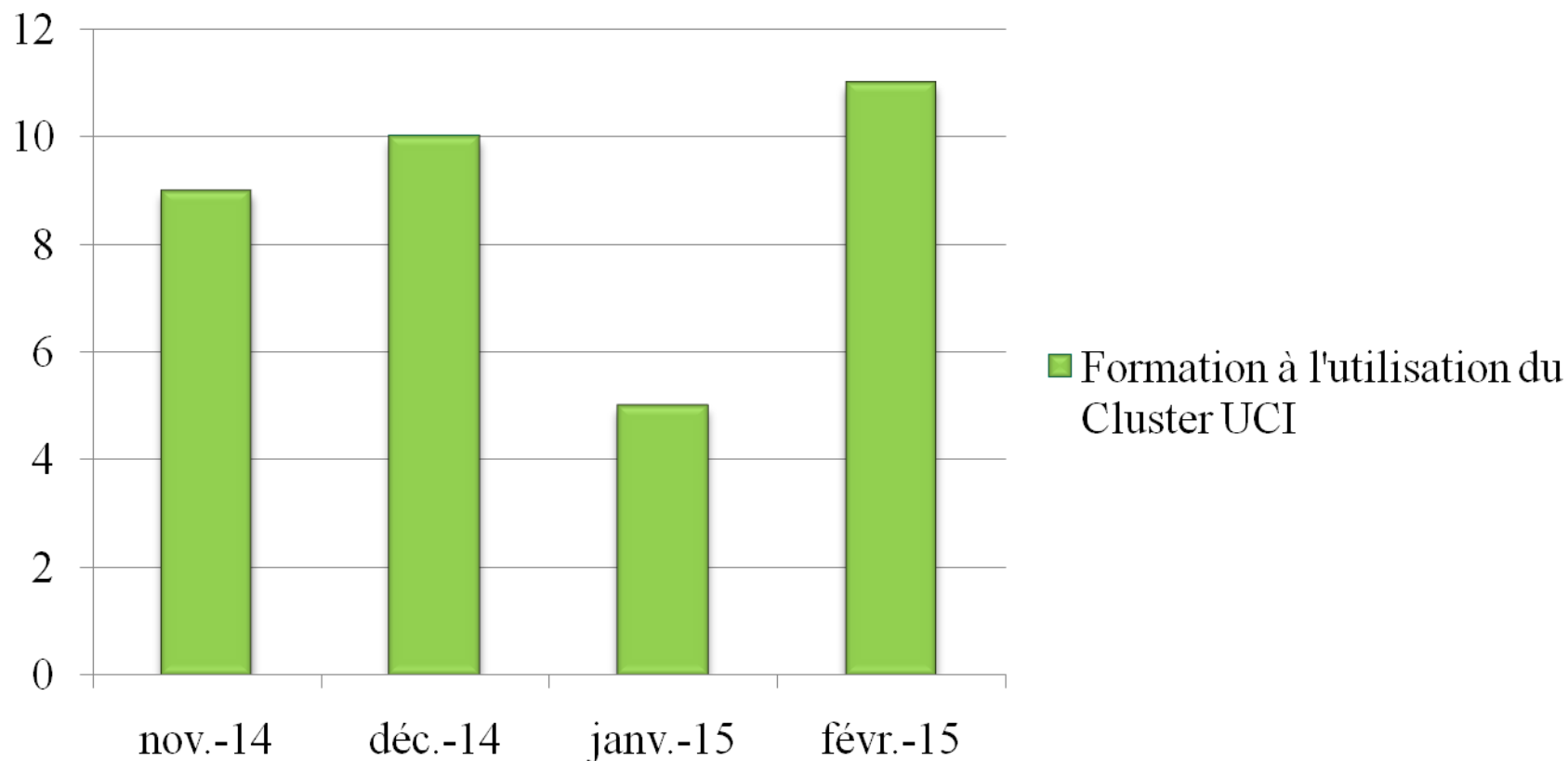
# Evénements UCI Oran 1

- ▶ Formation à l'initiation Linux et Familiarisation avec le Cluster BullX. ( 2014 – 2015 )
  - ▶ Journée Calcul Intensif : Dimanche 31 Mai 2015, Université Oran 1, Ahmed Ben Bella.
  - ▶ Formation au Calcul Parallèle avec MPI et Open-MP. ( 2016 )
- 



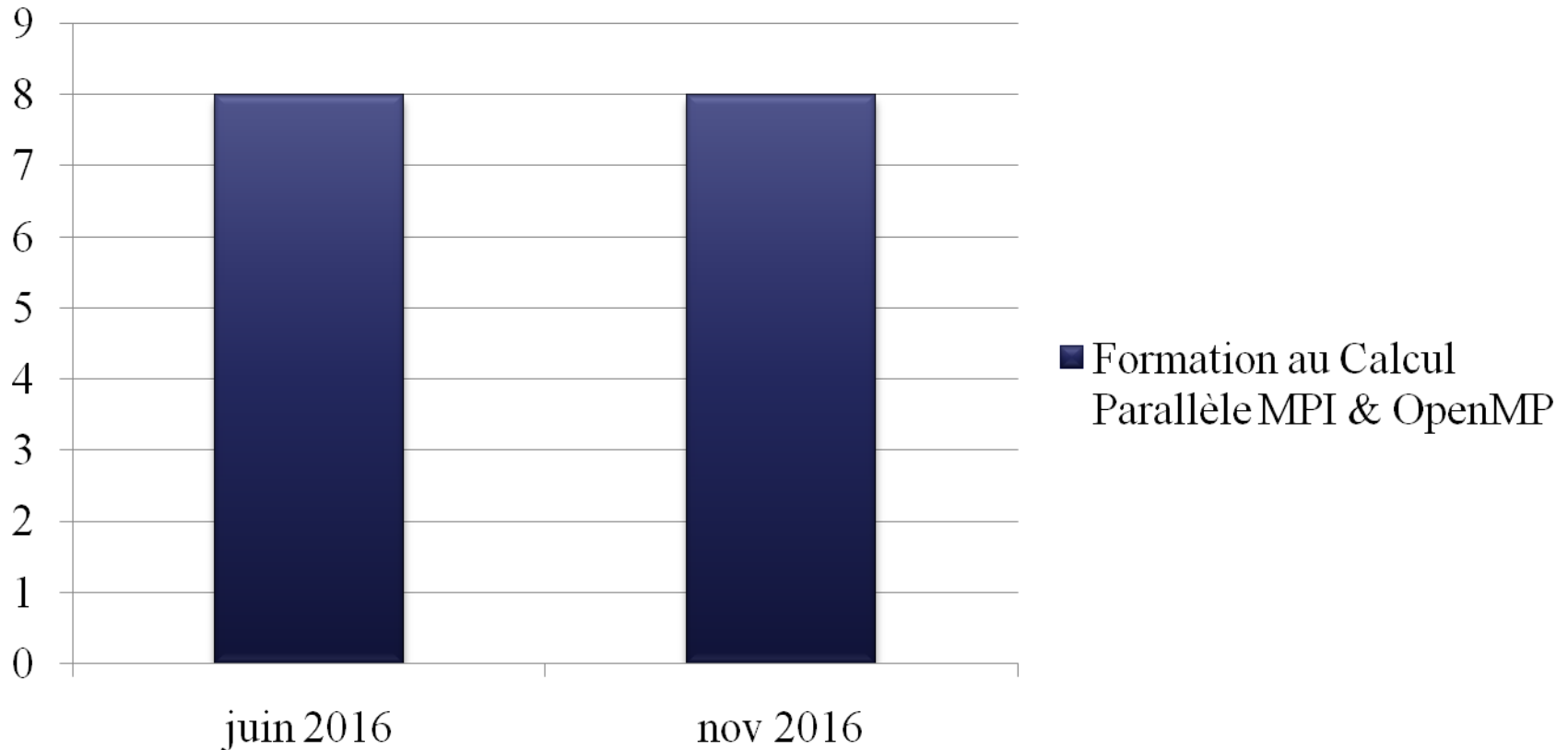
# Formation UCI Oran 1

## Formation à l'utilisation du Cluster UCI



# Formation UCI Oran 1

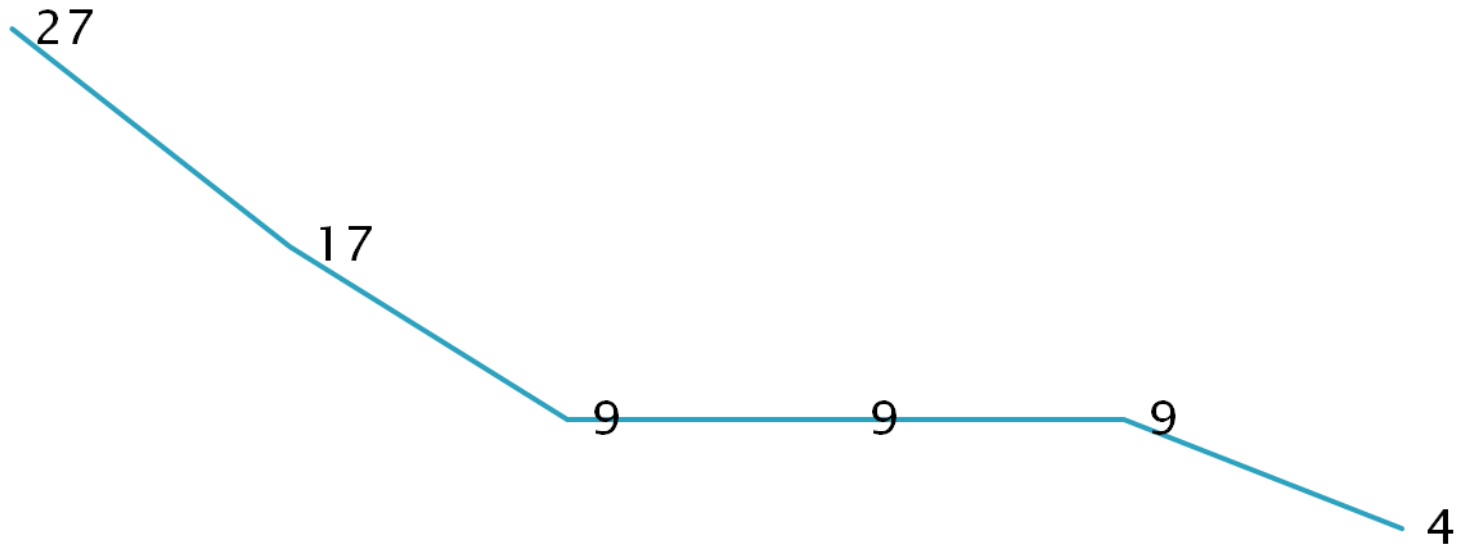
## Formation au Calcul Parallèle MPI & OpenMP



# Utilisateur UCI Oran 1

Nbr users / ans

*Total = 75*



2013

2014

2015

2016

2017

2018

# Publications UCI Oran 1

- ▶ Structure and dynamics of the peptide strand KRFK from the thrombospondin TSP-1 in water

W. Taleb Bendiab , B. Benomrane , B. Bounaceur , M. Dauchez , A. M. Krallafa

Received: 7 May 2017 / Accepted: 8 January 2018 / Published online: 14 February 2018

**Acknowledgements** The authors are deeply grateful to the University of Reims Champagne Ardennes (URCA, France) for providing us with computational resources and time on the Romeo cluster. We are equally grateful to the University of Oran (Algeria) for assigning us computational resources and time on Haytham at the UCI (Unité de Calcul Intensif).

- ▶ Ab initio molecular dynamics investigation of proton delocalization in crown ether complexes with H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> and NH<sub>4</sub><sup>+</sup>

W. Taleb Bendiab , F. Hamza Reguig , S. Hamad , B. Martinez-Haya , A. M. Krallafa

Received: 10 December 2015 / Accepted: 6 April 2016 / Published online: 12 April 2016

**Acknowledgments** The authors are deeply grateful to the University of Oran (Algeria) for computing resources and computer time used on Haytam at the UCI (Unité de Calcul Intensif). B. H. M. acknowledges funding from the Ministry of Science and Innovation of Spain (Projects CTQ2012-32345 and CSD2009-00038), and by Junta de Andalucía and FEDER (Project P12-FQM-2310).

# Publications UCI Oran 1 (suite)

- ▶ A theoretical study of atropisomerism in N-(2-methylphenyl)-N'-(2-methylphenyl) thiourea and its inclusion in the  $\beta$ -cyclodextrin  
A. M. Touadjine , A. Mostefai , A. Rahmouni , S. Humbel , A. Krallafa  
Received: 6 January 2017 / Accepted: 3 May 2017 / Published online: 19 May 2017

**Acknowledgements** We acknowledge the University of Oran (Algeria) and the Aix-Marseille University, France for computer resources.

- ▶ Ab-initio molecular dynamics and vibrational Raman spectroscopy investigations of quartz polymorph at high temperature  
Hayet Sediki , Patrick Simon , Aomar Hadjadj , Abdelghani M. Krallafa  
Received 24 March 2017 / Received in final form 5 May 2017 Published online 18 September 2017

The authors are deeply grateful to the National Centre for Scientific Research (CNRS), CEMHTI in Orléans (France) for the experiments and Raman measurements. We are equally grateful to the University of Oran (Algeria) for computing resources and computer time used on Haytham at the UCI (Unité de Calcul Intensif), and to the University of Reims Champagne Ardennes (URCA, France) for computing resources and computer time used on romeo calculator.

# Publications UCI Oran 1 (suite)

- ▶ Determination of the strong coupling constant from ATLAS measurements of the inclusive isolated prompt photon cross section at  $\sqrt{s} = 7$  TeV.

Boussaha Bouzid , Farida Iddir , and Lahouari Semlala

arXiv:1703.03959v1 [hep-ph] 11 Mar 2017

## V. ACKNOWLEDGEMENTS

This work was realized with the support of the FNR (Algerian Ministry of Higher Education and Scientific Research), as part of the research project D018 2014 0044. The authors are grateful to Olivier Pène and Michel Fontannaz for many useful discussions on this work; and we thank the laboratory of theoretical physics (LPT, Université Paris-Sud, Orsay) for its warm hospitality during our visits there. In addition, we gratefully acknowledge the UCI Computing Centre of Oran-1 University and its Staff for delivering so effectively the computing infrastructure essential to our work.

- ▶ Cité comme Plateforme de calculs dans un PFE de Master dont le theme “**Propriétés structurales, électroniques et optiques des polytypes de carbure de silicium (SiC) par les fonctionnels classiques et hybrides : Calculs de premier principe**”

Soutenu, le : 21 juin 2017 par : **Zoubida FEKROUNI**

Cité à la page 43 ref : 29.



# Mutualisation

## HAYTHEM – IBNBADIS – ASELKAM

- ▶ Synchronisation des fichiers Group, Passwd, Shadow sur des pages d'identificateur (IDs).
- ▶ Garantir l'accès à tous les Clusters connectés.
- ▶ Offrir aux utilisateurs diverse possibilité pour lancé des calculs.
- ▶ Plus de ressources à partager



**Merci**